

## Die Möglichkeiten der Simulation in der Entwicklung und Optimierung von Batterien

Prof. Dr. Arnulf Latz

Institut für Technische Thermodynamik (ITT), DLR Stuttgart

Helmholtz Institut Ulm für Elektrochemische  
Energiespeicherung

## Aktivitäten des ITT am DLR zur Elektromobilität

- **Elektrische Speicher – Batterien**
  - Inhärent sichere Batteriesysteme (Materialien) und „Next Generation“ Batterien (Titanat-Anoden, Siliziumkomposit-Anoden, Hochvolt-systeme, Metall-Batterien)
  - Zyklenstabilität und Sicherheit durch selbst konzipiertes Batteriemanagementsystem
- **Range-Extender mit BZ / Batterie-BZ Direkthybridisierung**
  - Erhöhte Reichweite und optimiertes Energiemanagementsystem
- **Thermomanagement von Elektrofahrzeugen**
  - Thermochemische und PCM Speicher für aktive und passive Speicherfunktionen
- **On-board Wasserstoff-Feststoffspeicher**
  - Kombi-Tank-Konzept unter Verwendung komplexer und konventioneller Hydride

## Kompetenzen

- Detaillierte Simulation, Qualifizierung und Test von Batterie- und BZ-Systemen
- Erfahrungen mit BZ- (bis 50 kW) und Batteriesystemen (bis 33 kWh)
- Entwicklung fahrzeugangepasster PCM- und Metallhydridspeicher
- Detaillierte H<sub>2</sub>-Speicher Simulation und experimentelle Validierung bis 150 bar und 200°C

## Helmholtz Institut Ulm für Elektrochemische Energiespeicherung



- Zentrum zur Erforschung elektrochemischer Energiespeicherung
- Gegründet Januar 2011
- Neues Gebäude auf dem Campus der Universität Ulm für 80 Wissenschaftler (2014)
- DLR Batteriemodellierungsaktivitäten sind in HIU integriert



Karlsruher Institut  
für Technologie



Universität Ulm



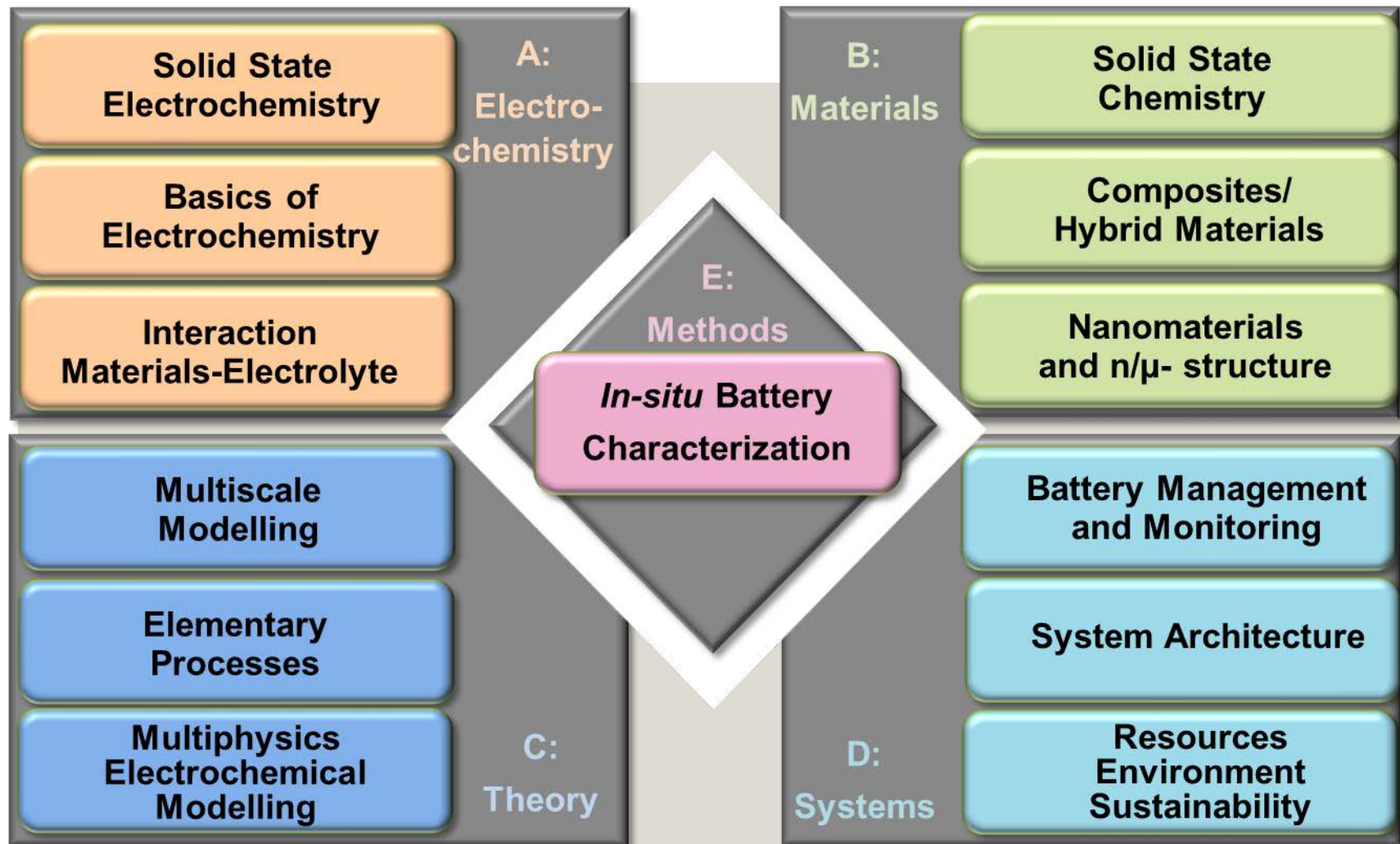
Zentrum für  
Sonnenenergie- und  
Wasserstoff-Forschung  
Baden-Württemberg



Deutsches Zentrum  
für Luft- und Raumfahrt

<http://www.hiu.kit.edu/>

## Forschungsgebiete des HIU



## Überblick

- Anforderungen an Batterien für PHEV/Konsequenzen für Modellierung
- Modellierungsstrategien
- Die Zelle als der Ausgangspunkt für qualitative Verbesserungen
- Zusammenfassung

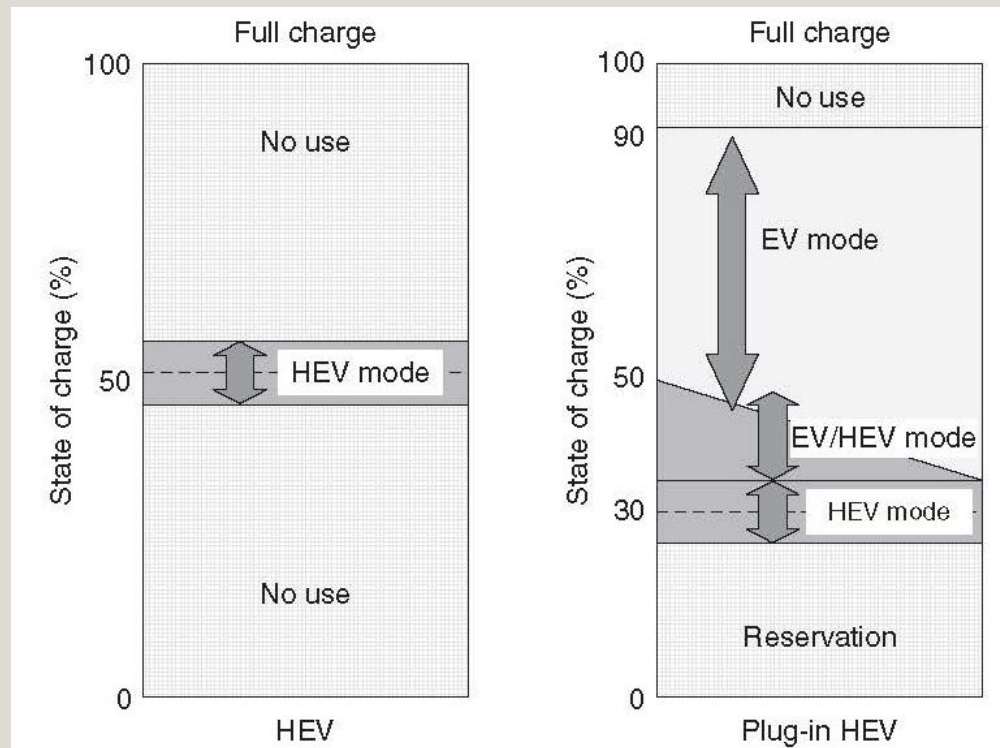
## HEV vs. PHEV

### HEV

- Nur relativ kleine SOC Variationen
- Kein rein elektrischer Antrieb über große Strecken
- High Power

### PHEV

- Voll geladener Zustand zu Betriebsbeginn
- Externe Aufladung
- Reiner EV Betrieb
- High Energy+High Power



Kobayashi 2009

## Definition der Fahrzyklen für PHEV

### CD-Betrieb

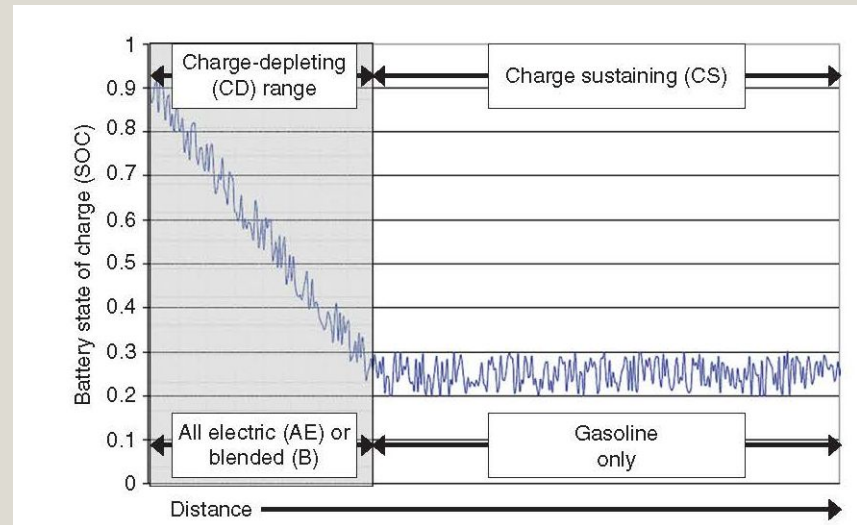
- Rein elektrisch
- Gemischt elektrisch-Benzin
- Fast gesamter SOC Bereich wird ausgenutzt

### CS Betrieb

- Reiner Benzinantrieb
- Keine Wiederbeladung der Batterie

Modellierung muss

SOC und C-Raten Abhängigkeit aller Parameter erfassen



Kroemer and Heywood 2007



# PHEV Leistungsziele und Batterieanforderungen

	Units	USABC		MIT	EPRI	
<b>Performance Goals</b>						
CD range	Miles	10	40	30	20	60
CD operation <sup>a</sup>	Type	AE	AE	B	AE	AE
Body type	Type	Cross-over SUV	Mid-size car	Mid-size car	Mid-size car	Mid-size car
Electricity use <sup>b</sup>	kWh/mile	0.42	0.30	0.19	0.24	0.24
Depth of discharge	Percent	70%	70%	70%	80%	80%
Drive schedule	Type	UDDS	UDDS	UDDS, HFWET, US06	UDDS, HFWET	UDDS, HFWET
Battery mass	kg	60	120	60	159	302
Vehicle mass	kg	1,950	1,600	1,350	1,664	1,782
<b>Battery Requirements</b>						
<i>(1) Power</i>						
Peak power	kW	50	46	44	54	99
Peak power density	W/kg	833	383	733	340	328
<i>(2) Energy</i>						
Total energy capacity	kWh	5.6	17.0	8.0	5.8	17.9
Total energy density	Wh/kg	93	142	133	37	59
<i>(3) Life</i>						
Calendar life	Years	15	15	15	10	10
CD cycle life	Cycles	5,000	5,000	2,500	2,400	1,400
CS cycle life	Cycles	300,000	300,000	175,000	200,000	200,000
<i>(4) Cost</i>						
OEM price <sup>c</sup>	\$	1,700	3,400	2,560		
OEM price/total kWh	\$/kWh	300	200	320		

<sup>a</sup> Blended (B) or all-electric (AE) operation.

<sup>b</sup> Grid electricity only—equivalent to total available energy capacity divided by CD range.

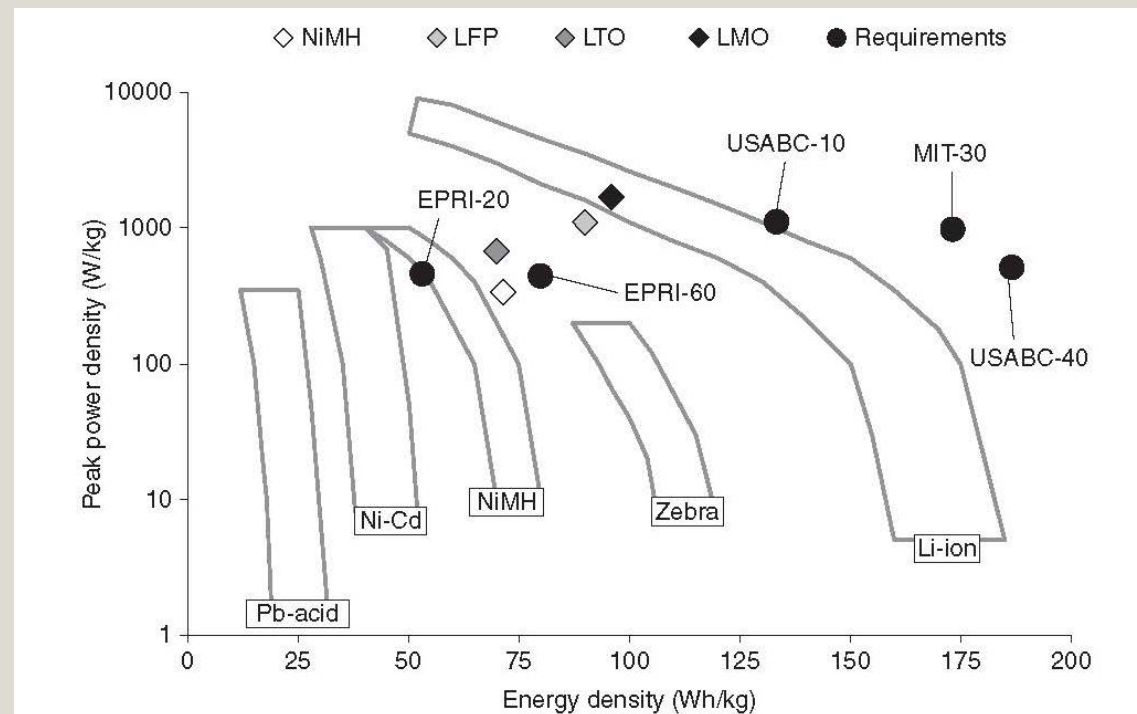
<sup>c</sup> Assuming 100,000 units of production per year.

## Welche Batterie kann Ziele erreichen?

### Annahmen

- Ragone Plot von Kalhammer et.al 2007
- Umrechnungsfaktor 0.75 von Zell auf Packeffizienz
- 85% DOD
- Motoreffizienz von 85%

Nur Li Ionenbatterien haben zurzeit Chancen die Anforderungen zu erfüllen



## Konsequenzen für Modellierung

- Li Ionenspezifische Aspekte sind relevant für PHEV
- Simulation muss die Erhöhung der Leistungs- und Energiedichte adressieren
- Kombination hoher Leistungsdichten und extremer SOC erhöht Degradation
- Degradation beginnt auf Zellebene
- Selbst bei optimalem thermischen Management beeinflusst das Zell- und Elektrodendesign die Degradationswahrscheinlichkeit

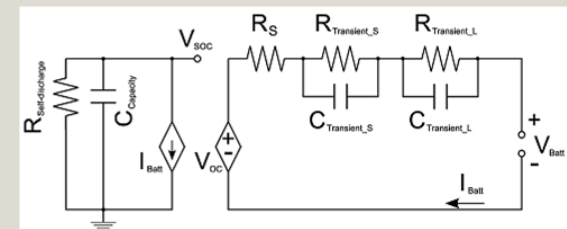
# Zellmodelle als Ausgangspunkt für die Batterie- und Packmodellierung

Makroskopische Netzwerkmodelle

Kontinuumsbeschreibung elektro-chemischer Prozesse

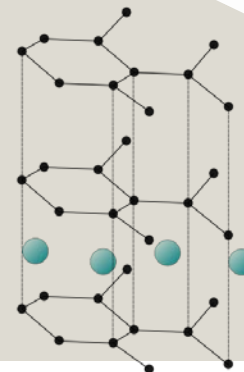
- Mesoskopische (Volumen gemittelte) Modelle
- Mikroskopische Elektrodenstruktur aufgelöste Modelle

Atomistic models



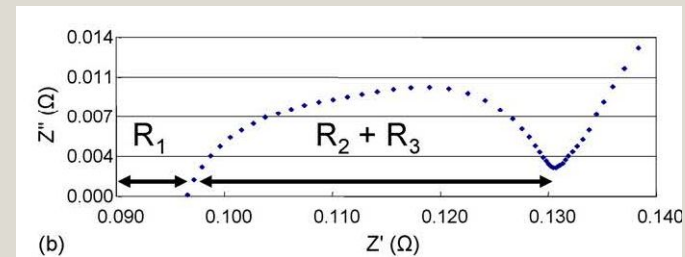
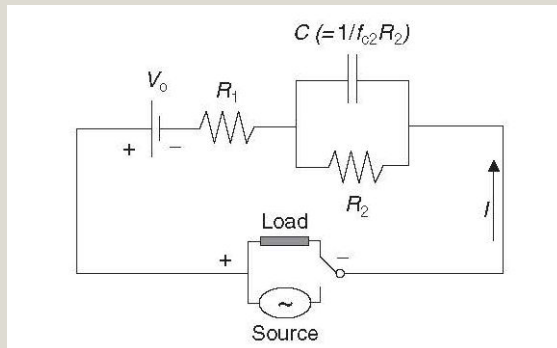
$$\vec{i}_e = -\kappa_{eff} \vec{\nabla} \Phi_e - \kappa_D \vec{\nabla} \ln c$$

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D_{eff} \vec{\nabla} c) - \frac{\vec{i}_e \cdot \vec{\nabla} t_+}{F} + \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{i}_e}{F} (1 - t_+)$$

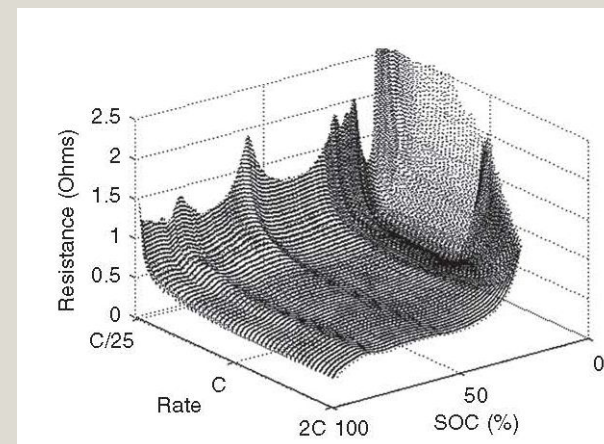


## Netzwerkmodelle

Dubarry,  
Liaw 2007



Widerstand als Funktion von  
SOC und C-Rate



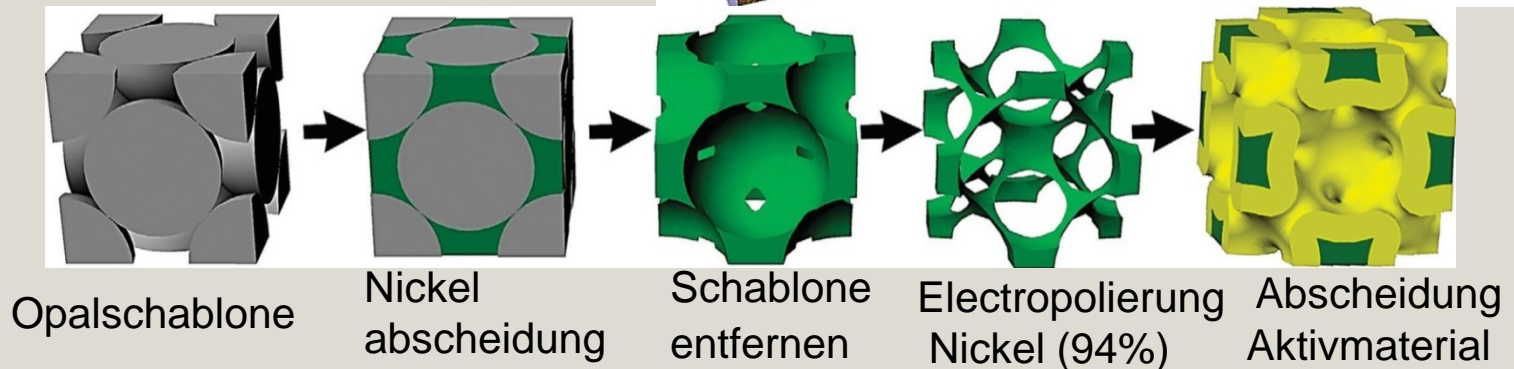
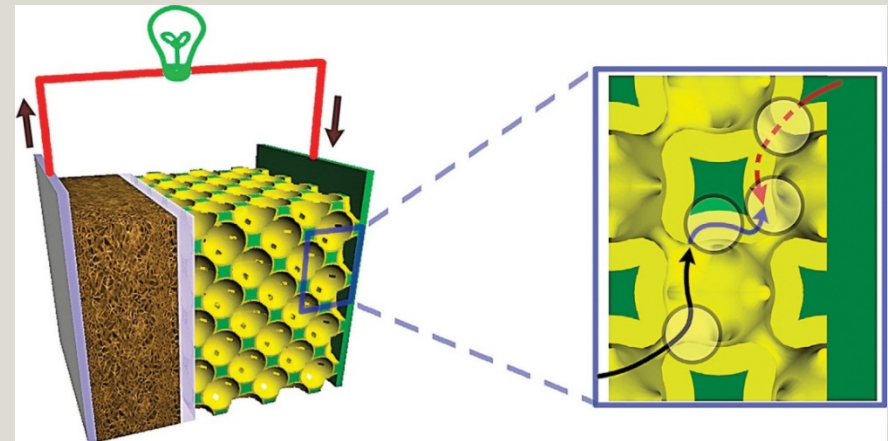
## Vor- und Nachteile von Netzwerkmodellen

- + Einfache Programmierung
- + Schnelle Berechnung
- + Enge Kopplung von Messmethode und Parameterbestimmung
- Parameter haben keine physikalische/chemische Bedeutung
- Komplexe C – Raten - und SOC -Abhängigkeit der Parameter
- Korrelationen zwischen innerem Zustand der Batterie und C – Rate werden nicht erfasst
- Keine Aussagen zur Designoptimierung (keine Geometrieinformation)

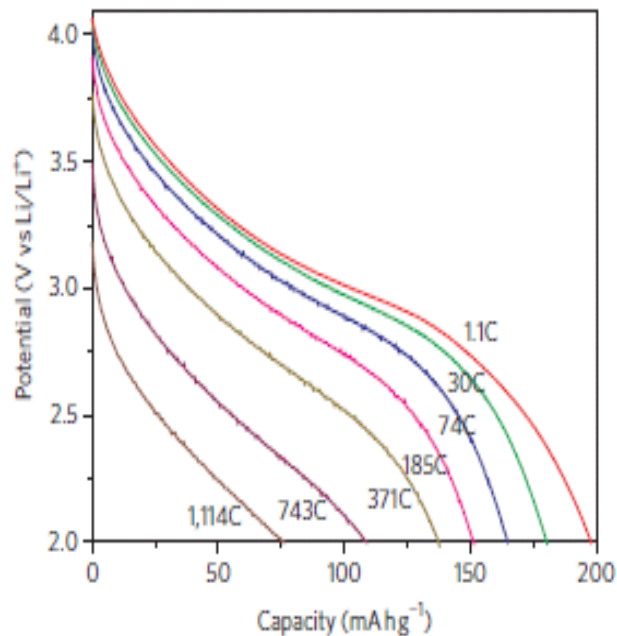
## Wie wichtig ist Geometrie?

Erhöhung der Leistungsdichte durch Nanostrukturierung

Dicke  $\sim 10 \mu\text{m}$   
Porengröße 466nm  
Aktivmaterial 30-40 nm

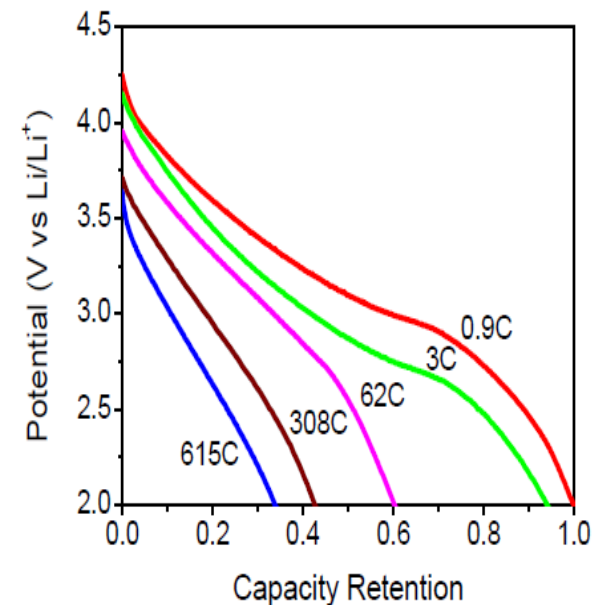


Schichtdicke 30nm  $\text{MnO}_2$   
Kleinere Gesamtkapazität  
Größerer Restkapazität



Zum Vergleich: 2-3 C maximale Rate für PHEV

Schichtdicke 150nm-200nm  
Größere Kapazität  
Geringere Leistungsdichte



Zhang, Yu and Braun, Nature technology  
March 2011

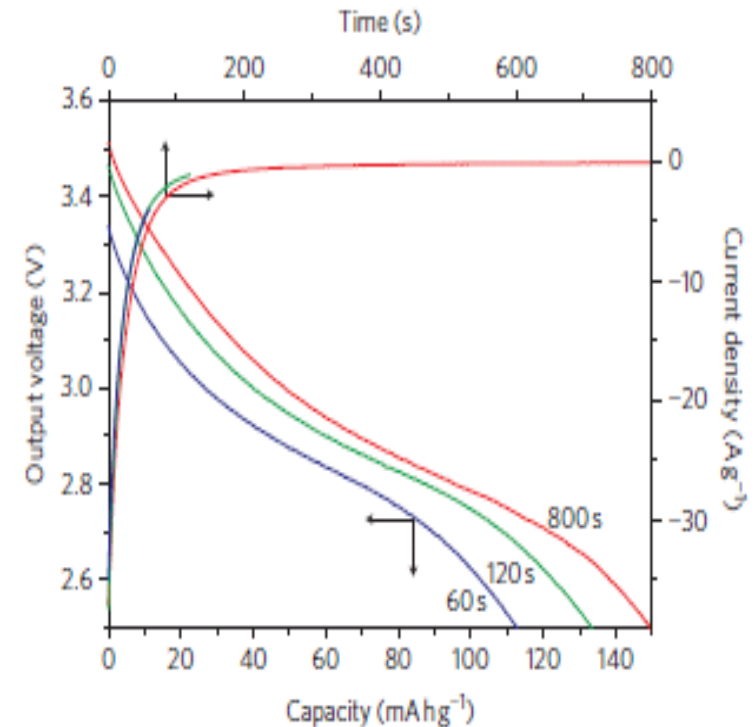


## Nanostrukturierte Batterien

Laden bei  $U=3.6\text{V}$  auf  
60% innerhalb 1min  
90% innerhalb 2min  
100% innerhalb 13min

Anfangsströmdichte  $35\text{A/g}$  oder  
 $177\text{C}$

Ist Strukturierung möglich, die  
Leistungsdichte mit ausreichender  
Energiedichte für PHEV  
Anwendungen kombiniert?

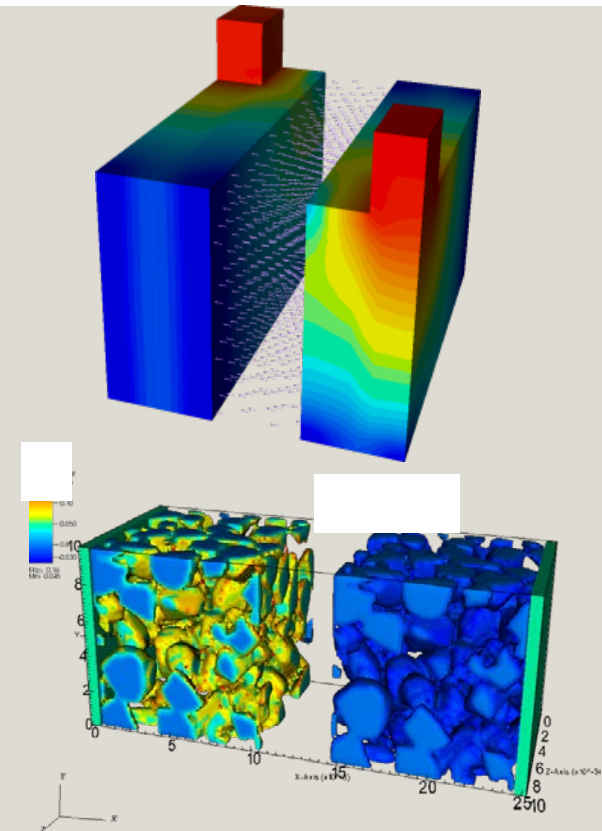


Zhang, Yu and Braun, Nature technology  
March 2011

## Physikalisch basierte Modellierung und Simulation

Prof. Dr. A. Latz

- Thermodynamisch konsistente elektrochemische Multiphysikmodellierung  
A. Latz and J. Zausch, J. Power Sources 196, 3296–3302 (2011)
- Finite-Volume Code basierend auf dem Fraunhofer CoRheoS framework
  - Newton algorithmus für nichtlineare Iterationen
  - Algebraisches Mehrgitterverfahren (SAMG) für Lineare Algebra
- Input: Geometrie und Materialparameter
- Output: Li-Ionen Konzentration  $c$ , elektrische Spannung  $\phi$ , Temperatur  $T$  in jedem Raumpunkt



## Lithium-Ionen Konzentration

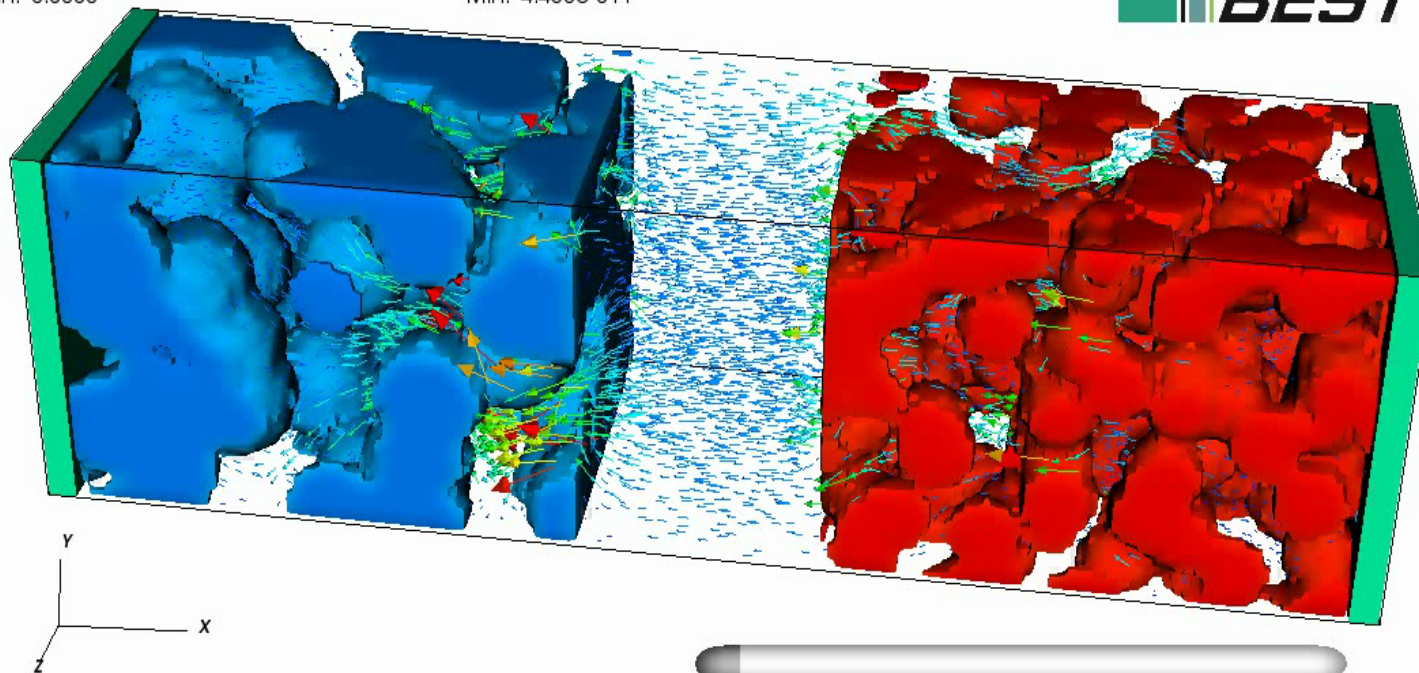
Prof. Dr. A. Latz

Pseudocolor  
Var: concentration

Max: 0.02066  
Min: 0.0000

Vector  
Var: current density

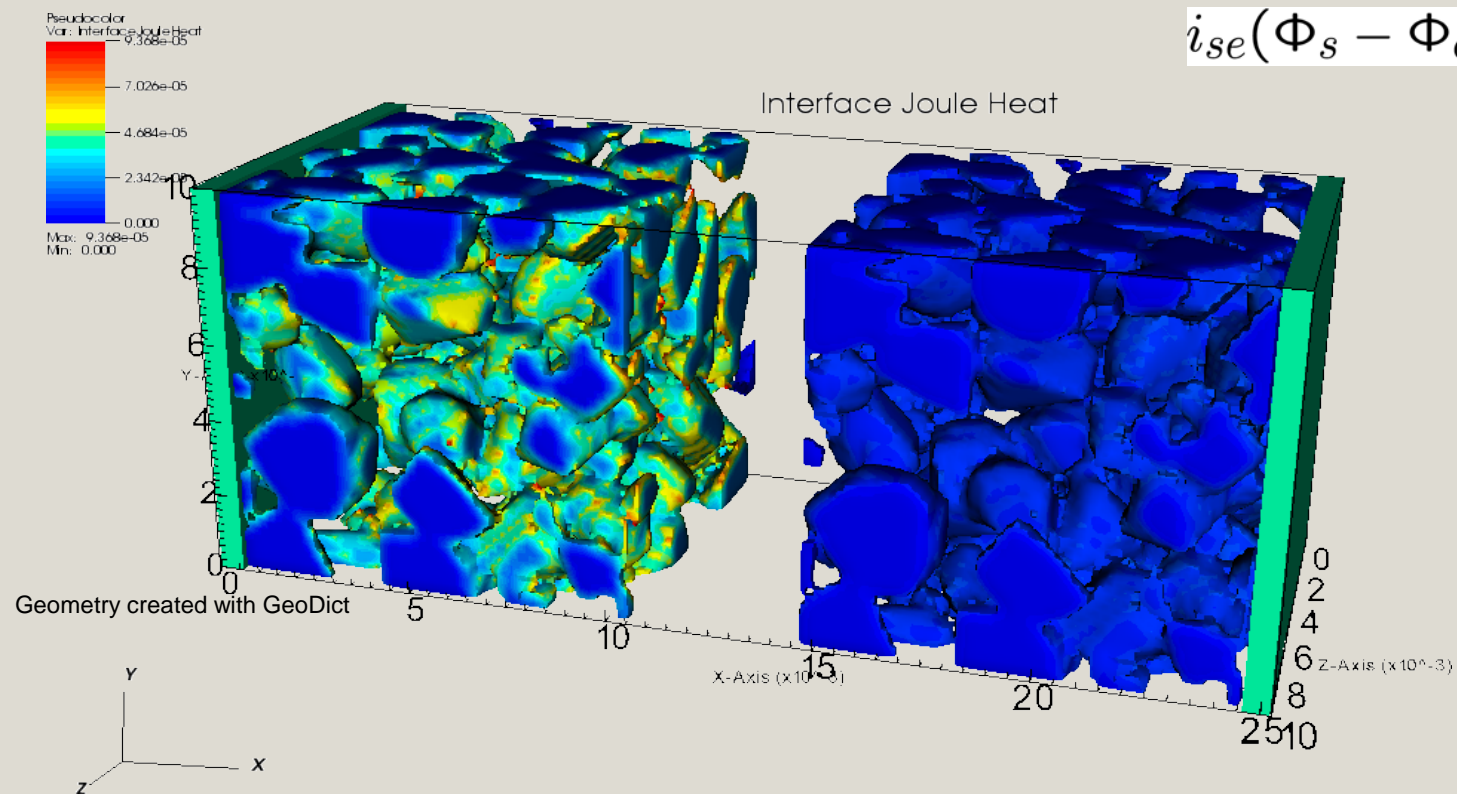
Max: 0.1902  
Min: 4.450e-011



Time=40 s

Structure from GeoDict®

## Verteilung der Joule'schen Wärme auf Grenzflächen



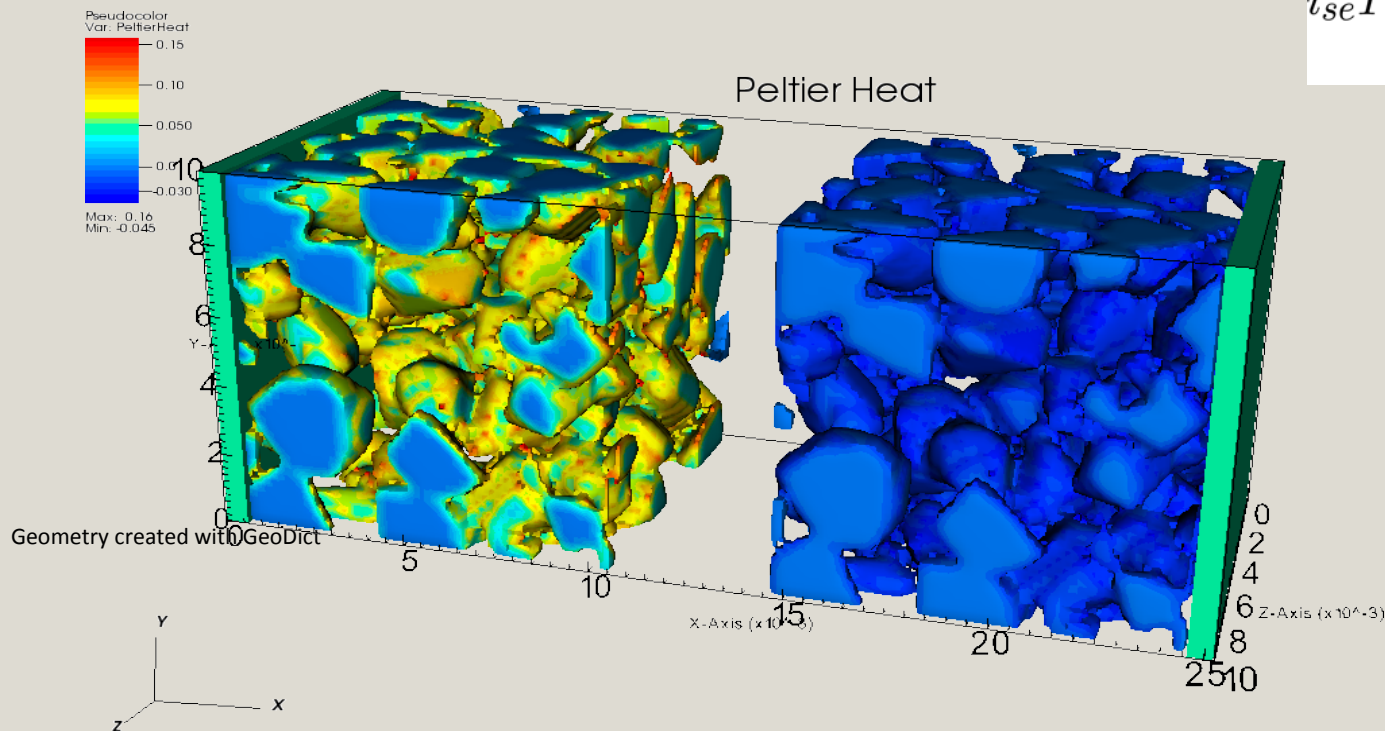
Simulation with



© Fraunhofer ITWM

## Verteilung der reversiblen Wärmequellen

$$i_{se}T \left\{ \frac{\partial(U_0 + \frac{\mu_e - \mu_{Li}}{z_+ F})}{\partial T} \right\}$$



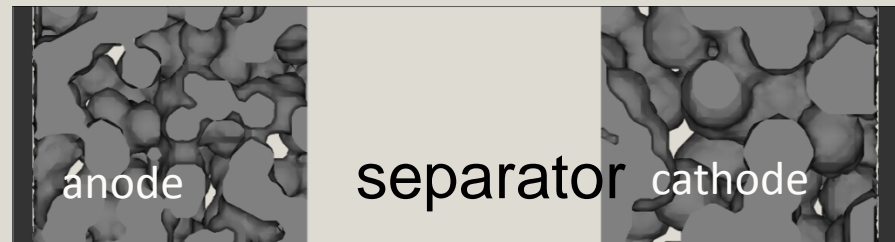
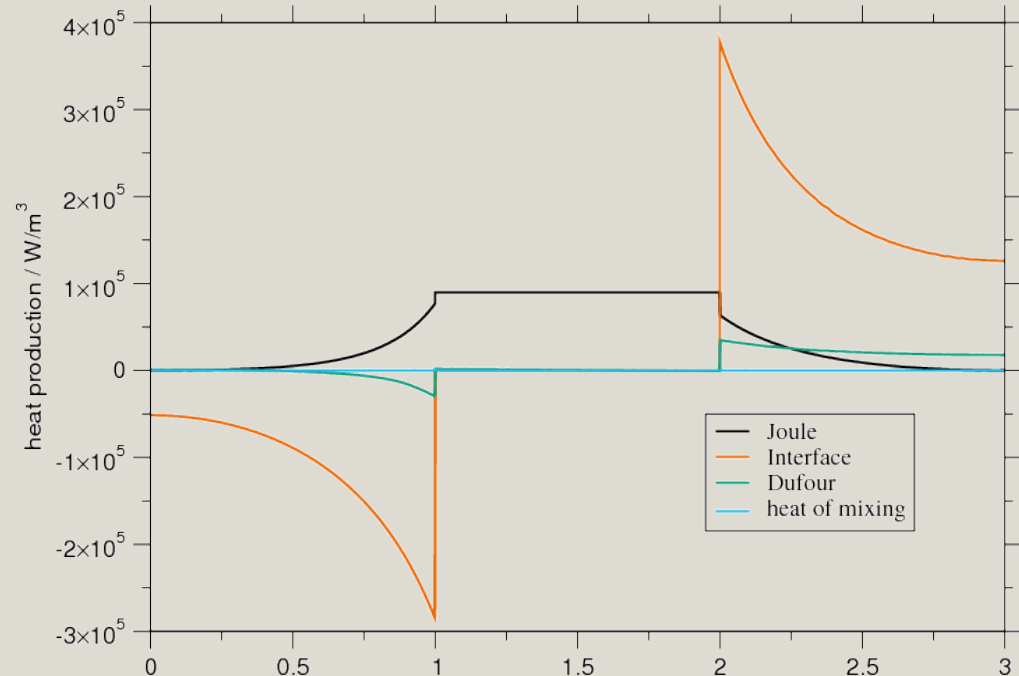
Simulation with



© Fraunhofer ITWM

## Abhängigkeit der Wärmequellen vom Ladezustand

- 2C Entladung
- Batterie fast voll



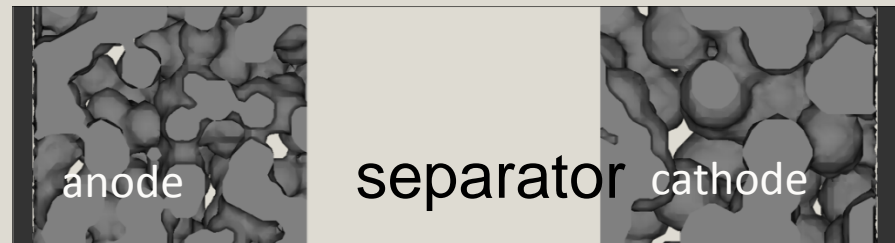
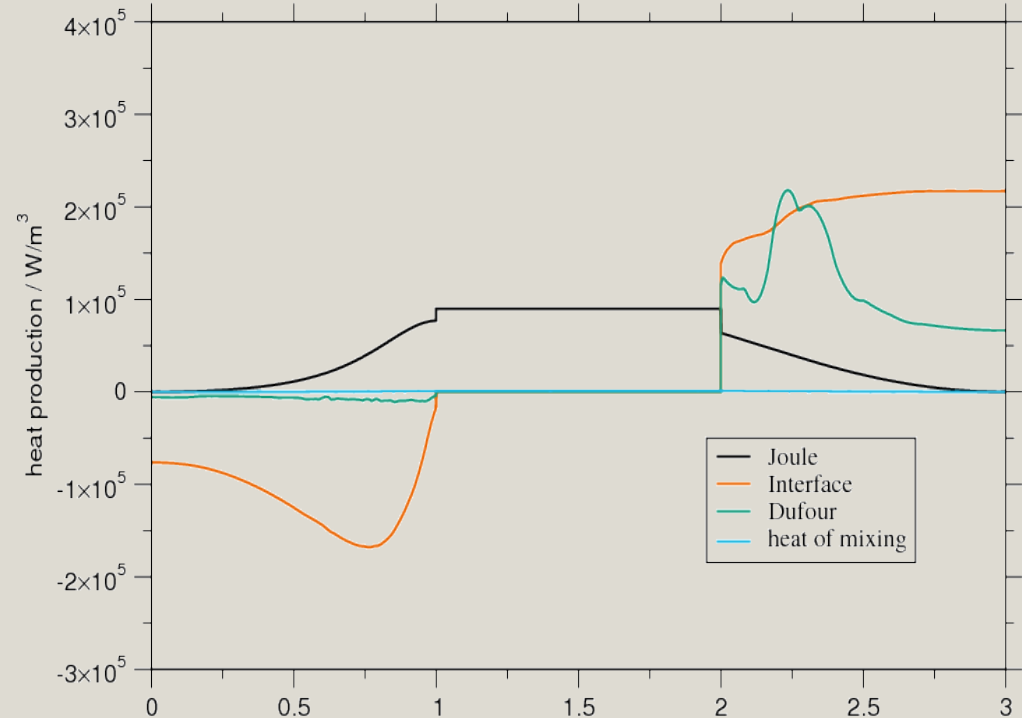


## Abhängigkeit der Wärmequellen vom Ladezustand

- 2C Entladung
- Batterie fast leer

### Dominante Effekte

- Separator: **Joule'sche Wärme**
- Elektroden: **reversible** **Oberflächeneffekte**



## Übergang zur Systemebene

Zwei verschiedene Ansätze sind möglich

1. Trainiere Netzwerkmodelle mit physikalisch basierten Simulationen
  - Komplexe SOC und C Raten Abhängigkeit der Widerstände durch Simulation
  - Fahrzyklen können direkt in Netzwerkparameter übersetzt werden
2. Setze Modellreduktionsverfahren für beschleunigte Simulation ein

Beide Ansätze sind Gegenstand aktueller Forschung am DLR und Fraunhofer ITWM



## Zusammenfassung

- PHEV Anwendungen von Batterien erfordern zusätzlich zu optimierten Batteriemanagement und thermischem Management Systemen Optimierungen auf Zellebene
- Netzwerkmodelle sind ideal für Systemebene, leisten aber keinen Beitrag zur Zelloptimierung
- Physikalisch basierte Modellierungs – und Simulationsmethoden sind ein sinnvoller Ansatz Optimierungsstrategien für Zelldesigns zu erforschen